

ПОВЕРХНОСТНЫЕ СОСТОЯНИЯ В ТОЧНО РЕШАЕМОЙ МОДЕЛИ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ ПЛЕНКИ

© Е.Я.Глушко

Криворожский педагогический институт,
324000 Кривой Рог, Украина
(Поступило в Редакцию 17 декабря 1994 г.
В окончательной редакции 29 июня 1995 г.)

1. Возможность расчета характеристик поверхностных состояний (ПС) в точно решаемых простых моделях представляет интерес как с точки зрения общих особенностей, условий существования, так и для анализа практикуемых приближений в расчетах реальных систем: полупроводниковых сверхструктур и неоднородных сред. Пример точно решаемой неограниченной системы квантовых ям дает известная задача Кронига-Пенни [1]. Для полуограниченных систем приближенное решение обычно получают подстановкой комплексного волнового вектора в трансляционно-инвариантное (ТИ) решение [2,3]. Попытка выхода за рамки ТИ-приближения была предпринята в [4], где с помощью тестовой δ -потенциальной модели анализировался эффективный гамильтониан гетероконтакта двух полупроводников.

В настоящей работе (см. также [5,6]) точное решение для ограниченной системы плоских одномерных потенциальных ям, разделенных стенками переменной проницаемости, используется для описания общих свойств ПС в методе $E\Omega$ -диаграмм. Рассмотрено влияние сил изображения на спектр модели одномерного кристалла.

2. Гамильтониан модели N одномерных плоских потенциальных ям шириной a , разделенных бесконечно тонкими барьерами с коэффициентами непроницаемости $\Omega(E)$, зависящими от энергии E , имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{m^*} \left(-\frac{\Delta}{2} + \Omega(E) \sum_{l=1}^{N-1} \delta(x - la) \right), \quad (1)$$

где m^* — масса электрона. В несимметричном случае левый и правый барьеры всей пленки равны U_0 и U_1 соответственно. Полагаем $U_1 > U_0$. Второе слагаемое в (1) с $\Omega = \Omega(E)$ представляет собой предельный переход к случаю некоторого непрямоугольного барьера, когда его размеры стремятся к нулю. Стандартные граничные условия (ГУ) без использования ТИ-приближения, записанные последовательно для каждого из межъямных барьеров

$$\begin{cases} \Psi(-) = \Psi(+), \\ \Psi'(-) + \Omega(E)\Psi(-) = \Psi'(+) - \Omega(E)\Psi(+) \end{cases} \quad (2)$$

(где знаки \pm определяют волновую функцию слева и справа от барьера), приводят к системе $2N + 2$ линейных однородных уравнений

для амплитуд плоских волн A_i, B_i . Детерминант матрицы ГУ можно выразить в виде произведения матриц

$$\det = (\lambda_0, -\nu_0) \hat{\Lambda}^m \begin{pmatrix} \nu_1 \\ -\lambda_1 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где

$$\lambda_i = k(\Omega + k_i) \cos ka + (\Omega k_i - k^2) \sin ka, \quad \nu_i = k_i \sin ka + k \cos ka,$$

$$i = 1, 2; \quad k = (2mE)^{1/2}/\hbar; \quad k_i = [2m(U_i - E)]^{1/2}/\hbar; \quad \hat{\Lambda} = \begin{bmatrix} \mu & \nu \\ \lambda & \nu \end{bmatrix},$$

$$\lambda = (\Omega^2 - k^2) \sin ka + 2\Omega k \cos ka, \quad \nu = \sin ka, \quad \mu = -\Omega \sin ka - k \cos ka. \quad (4)$$

Благодаря равенству диагональных элементов в $\hat{\Lambda}$ степени $\hat{\Lambda}^m$ выражаются через четные и нечетные слагаемые биномиальных разложений

$$\hat{\Lambda}^m = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} (\mu + \sqrt{\lambda\nu})^m + (\mu - \sqrt{\lambda\nu})^m, & \xi \sqrt{\frac{\nu}{\lambda}} \left((\mu + \sqrt{\lambda\nu})^m - (\mu - \sqrt{\lambda\nu})^m \right) \\ \left((\mu + \sqrt{\lambda\nu})^m - (\mu - \sqrt{\lambda\nu})^m \right) \bar{\xi} \sqrt{\frac{\lambda}{\nu}}, & (\mu + \sqrt{\lambda\nu})^m + (\mu - \sqrt{\lambda\nu})^m \end{bmatrix}, \quad (5)$$

где $\xi = \text{sign}(\nu)$, $\bar{\xi} = \text{sign}(\lambda)$. Спектр системы дается нулями \det (3), а характер энергетического спектра зависит от знака произведения $\lambda\nu$.

В области $\lambda\nu > 0$ ($\xi = \bar{\xi}$)¹ существуют генерируемые поверхностью изолированные или локальные уровни. Если число потенциальных ям велико $m \gg 1$, то дисперсионное уравнение локальных состояний получается из (3) с учетом (5)

$$\sqrt{\frac{\lambda}{\nu}} = \varsigma \frac{\lambda_i}{\nu_i}, \quad \varsigma = \xi \text{sign}(\mu). \quad (6)$$

Две ветви ПС ($l = 1, 2$) определяются левым и правым внешними барьерами.

Варьируя параметр Ω , можно получить наглядную картину энергетического спектра системы ($E\Omega$ -диаграмма). На рисунке приведена $E\Omega$ -диаграмма для интервала непроницаемостей барьеров $\Omega a \in [-30, 30]$ при внешних барьерах $g_1 = g_0 = 16/a$. Области $\Omega < 0$ отвечает система δ -образных впадин. Последний случай был рассмотрен в [4], однако точное решение там не было найдено. Заметим, что предложенная процедура решения допускает зависимость параметров Ω, a, m^* от энергии E . Если непроницаемости внутренних барьеров $\Omega = \text{const}$, то картина состояний дается соответствующим вертикальным сечением $E\Omega$ -диаграммы. Для произвольного случая $\Omega = \Omega(E)$ следует пользоваться рисунком как номограммой. В качестве примера рассмотрим ограниченный потенциал Кронига-Пенни с достаточно тонкими барьерами. Пусть b — конечная толщина стенок барьеров, а

¹ В работе [5] рассмотрен случай $\xi = \bar{\xi} = 1$.

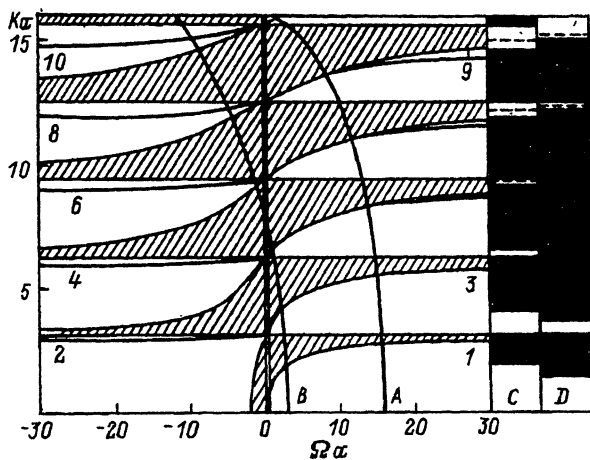


Диаграмма энергетического спектра симметричной системы плоских потенциальных ям для $ga = 16$, $g_1a = 16$.

Разрешенные зоны энергий заштрихованы. Кривые 1-10 относятся к левому поверхностному уровню, кривая A отвечает $k = k_0(E)$, кривая B — $\Omega = \Omega(E)$ для сверхрешетки GaAs/GaAlAs. Колонка C — спектр сверхрешетки GaAs/GaAlAs для стандартных ГУ. Колонка D — спектр сверхрешетки GaAs/GaAlAs для ГУ Вастарда.

\bar{U} — высота барьеров. Тогда стыковка волнового и туннельного движения дает для непроницаемости

$$\Omega(E) = \bar{k}(\text{ch } \bar{k}b - 1) / \text{sh } \bar{k}b, \quad (7)$$

где

$$\bar{k} = [2m(\bar{U} - E)]^{1/2} / \hbar.$$

Кривая B на рисунке показывает зависимость $\Omega(E)$ для сверхрешетки GaAs/Ga_{0.5}Al_{0.5}As при $a = 110 \text{ \AA}$, $b = 0.1a$, $\bar{U} = 384 \text{ meV}$, $V_0 = 4.07 \text{ eV}$, $m^* = 0.067m_0$, где m_0 — масса электрона [7]. Область $\Omega < 0$ отвечает надбарьерному движению частицы. Соответствующая картина энергетического спектра, «отбираемая» кривой B на $E\Omega$ -диаграмме, приведена на рисунке в колонке C . Если учесть в соответствии с [8] различие эффективных масс электронов в слоях GaAs и GaAlAs, то второе из условий (2) примет вид $\bar{\Psi}'_1 = \Psi'_1 m_b / m_a$ (ГУ Вастарда, $\Omega = 0$). Спектр для этого случая приведен в колонке D (см. рисунок). Сужение запрещенных зон объясняется более слабым рассеянием частиц на барьерах, когда непрерывность производной волновой функции заменяет непрерывностью плотности тока. При данных параметрах реализуются шесть зон, причем ПС отщепляются лишь от верхних трех.

3. Условие отщепления ПС охватывает три области на $E\Omega$ -диаграмме (кривая A на рисунке): а) $\Omega > k_1(\Omega)$, где ПС отщепляются от дна зон; б) $\Omega < k_0(\Omega)$, где ПС не возникают; в) $k_1(\Omega) > \Omega > k_0(\Omega)$, где есть только ПС, генерируемые поверхностью U_0 .

Развитый метод позволяет также учитывать влияние приповерхностного потенциала изображения на энергетический спектр. Аппроксимируя ступенчатой зависимостью известное выражение для потенциала изображения вблизи плоской границы раздела [9] $U(x) \sim 1/x$,

получаем для дисперсионного уравнения

$$(-k_0, 1) \begin{bmatrix} \bar{\mu} & \bar{\nu} \\ \bar{\lambda} & \mu' \end{bmatrix} \hat{\Lambda}^{m-2r} \begin{bmatrix} \mu' & \bar{\nu} \\ \bar{\lambda} & \bar{\mu} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ k_1 \end{pmatrix} = 0, \quad (8)$$

где

$$\begin{bmatrix} \bar{\mu} & \bar{\nu} \\ \bar{\lambda} & \mu' \end{bmatrix} = \prod_{s=1}^r \begin{bmatrix} \mu_s & \nu_s \\ \lambda_s & \mu_s \end{bmatrix}. \quad (9)$$

Матричные элементы, входящие в произведение (9), определяются соотношениями (4), где следует подставить соответствующую зависимость дна потенциальной ямы от координаты x на протяжении r постоянных решетки. Деформация дна ямы вблизи правой границы дается произведениями в обратном порядке. Расчет $E\Omega$ -диаграммы контакта пленки GaAs с вакуумом ($\epsilon_1 = 12.8$, $\epsilon_2 = 1$) для нескольких значений r (21, 41) дает вблизи потолка зон узкую полосу ПС, сопровождаемую одиночным уровнем. С ростом номера зон это отщепление ослабевает, однако «возгораются» ПС, обусловленные простым обрывом периодического потенциала. Абсолютные ширины приповерхностных полос, а также одиночных уровней составляют при данных параметрах $\cong 0.01$ eV, тогда как сдвиг дна потенциальных ям, согласно [9], составляет порядка 0.2 eV. Напротив, для пленки, граничащей с металлом ($\epsilon_2 \rightarrow \infty$), узкие полосы ПС отщепляются от дна зон.

В заключение отметим, что в семейство точно решаемых потенциалов входит также трехмерный потенциал сферической сверхрешетки, представляющей собой слоистый шар с одинаковыми толщинами слоев, разделенных дельтообразными барьерами. Подобные сверхструктуры теоретически изучены слабо. Рассмотренная выше процедура в полной мере применима к центрально-симметричным состояниям в такой системе — сферическим волнам. Аналитический вид решений (6) не изменяется в этом случае: вместо ν_0 , λ_0 следует лишь подставлять $\nu_0 = \nu^2/a$, $\lambda_0 = \mu^2 + \lambda\nu + \mu\nu/a$.

Список литературы

- [1] Kronig R.L., Penney W. Proc. Roy. Soc. **130**, 499 (1931).
- [2] Тамм И.Е. ЖЭТФ **3**, 34 (1933); Лифшиц И.М., Пекар С.И. УФН **56**, 4, 531 (1995).
- [3] Силин А.П. УФН **147**, 485 (1985).
- [4] Brezini A., Zekri N. Solid. State Commun. **86**, 9, 613 (1993).
- [5] Глушко Е.Я. ФТТ **36**, 8, 2417 (1994).
- [6] Глушко Е.Я., Евтеев В.Н. УФЖ **40**, 719 (1995).
- [7] Esaki L. IEEE J. Quantum Electron. **22**, 1611 (1986).
- [8] Bastard G. Phys. Rev. **B 24**, 5693 (1986).
- [9] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Курс теоретической физики. М. (1982). Т. VIII.